

(12) NACH DEM VERTRAG ÜBER DIE INTERNATIONALE ZUSAMMENARBEIT AUF DEM GEBIET DES
PATENTWESENS (PCT) VERÖFFENTLICHTE INTERNATIONALE ANMELDUNG

(19) Weltorganisation für geistiges Eigentum
Internationales Büro



(43) Internationales Veröffentlichungsdatum
25. August 2005 (25.08.2005)

PCT

(10) Internationale Veröffentlichungsnummer
WO 2005/078433 A1

(51) Internationale Patentklassifikation⁷: G01N 33/00,
G06F 17/30

(21) Internationales Aktenzeichen: PCT/CH2005/000081

(22) Internationales Anmeldedatum:
14. Februar 2005 (14.02.2005)

(25) Einreichungssprache: Deutsch

(26) Veröffentlichungssprache: Deutsch

(30) Angaben zur Priorität:
243/04 17. Februar 2004 (17.02.2004) CH

(71) Anmelder (für alle Bestimmungsstaaten mit Ausnahme
von US): NOVABLEND AG [CH/CH]; Rütistrasse 4,
CH-8952 Schlieren (CH).

(72) Erfinder; und

(75) Erfinder/Anmelder (nur für US): ANDRETTA, Carlo
[CH/CH]; Eichstrasse 4, CH-8142 Uitikon-Waldegg (CH).
BOMIO, Michele [CH/CH]; Ringstrasse 19c, CH-8903
Birmensdorf (CH).

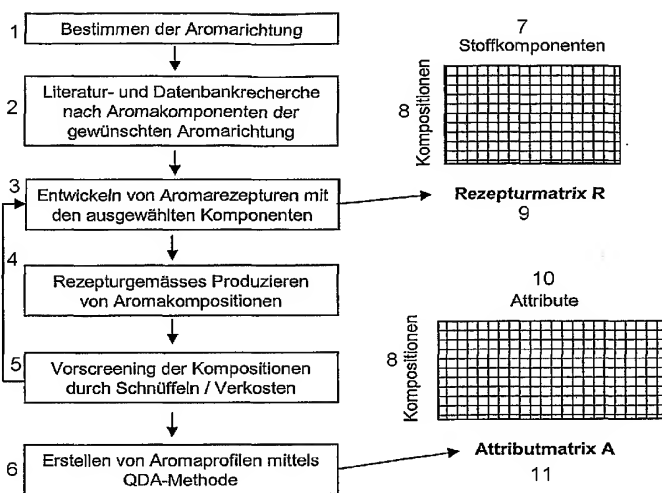
(74) Anwalt: SCHMAUDER & PARTNER AG; Zwängiweg
7, CH-8038 Zürich (CH).

(81) Bestimmungsstaaten (soweit nicht anders angegeben, für
jede verfügbare nationale Schutzrechtsart): AE, AG, AL,
AM, AT, AU, AZ, BA, BB, BG, BR, BW, BY, BZ, CA, CH,
CN, CO, CR, CU, CZ, DE, DK, DM, DZ, EC, EE, EG, ES,
FI, GB, GD, GE, GH, GM, HR, HU, ID, IL, IN, IS, JP, KE,
KG, KP, KR, KZ, LC, LK, LR, LS, LT, LU, LV, MA, MD,
MG, MK, MN, MW, MX, MZ, NA, NI, NO, NZ, OM, PG,
PH, PL, PT, RO, RU, SC, SD, SE, SG, SK, SL, SY, TJ, TM,

[Fortsetzung auf der nächsten Seite]

(54) Title: METHOD AND DEVICE FOR PRODUCING FRAGRANCE AND/OR AROMA COMPOSITIONS

(54) Bezeichnung: VERFAHREN UND VORRICHTUNG ZUR ERZEUGUNG VON DUFT- UND/ODER AROMAKOMPOSITIONEN



- 1 DETERMINE THE AROMA DIRECTION
- 2 LITERATURE AND DATABASE RESEARCH FOR AROMA COMPONENTS HAVING THE DESIRED AROMA DIRECTION
- 3 DEVELOP AROMA RECIPES USING THE SELECTED COMPONENTS
- 4 PRODUCE AROMA COMPOSITIONS ACCORDING TO RECIPES
- 5 PRESCREEN THE COMPOSITIONS BY SNIFFING/TASTING
- 6 ESTABLISH AROMA PROFILES USING THE QDA METHOD
- 7 SUBSTANCE COMPONENTS
- 8 COMPOSITIONS
- 9 RECIPE MATRIX R
- 10 ATTRIBUTES
- 11 ATTRIBUTE MATRIX A

(57) Abstract: The invention relates to a method for producing a fragrance and/or aroma composition using a composition database that contains recipe vectors and attribute vectors associated with groups of base compositions. According to the inventive method, a target attribute vectors is defined, an operator effecting the transformation of recipe vectors to attribute vectors in at least one surrounding of the target attribute vector is determined, a target recipe vector is determined under the proviso that it is transformed to the target attribute vector using said operator, and defined substance components are mixed with one another in proportions according to the target recipe vector.

(57) Zusammenfassung: Bei einem Verfahren zur Erzeugung einer Duft- und/oder Aromakomposition geht man von einer Kompositions-Datenbank aus, die für eine Gruppe von Basis-Kompositionen zugeordnete Rezepturvektoren und Attributvektoren enthält. Das Verfahren umfasst das Vorgeben eines Ziel-Attributvektors, das Bestimmen eines Operators, welcher zumindest in einer Umgebung des Ziel-Attributvektors eine Transformation von Rezepturvektoren auf Attributvektoren bewerkstelligt, das Ermitteln eines Ziel-Rezepturvektors mit der Massgabe, dass er unter Anwendung des besagten Operators zum Ziel-Attributvektor transformiert wird und das Vermischen von vorgegebenen Stoffkomponenten mit Mengenanteilen gemäss dem Ziel-Rezepturvektor.

WO 2005/078433 A1



TN, TR, TT, TZ, UA, UG, US, UZ, VC, VN, YU, ZA, ZM, ZW.

PL, PT, RO, SE, SI, SK, TR), OAPI (BF, BJ, CF, CG, CI, CM, GA, GN, GQ, GW, ML, MR, NE, SN, TD, TG).

(84) Bestimmungsstaaten (*soweit nicht anders angegeben, für jede verfügbare regionale Schutzrechtsart*): ARIPO (BW, GH, GM, KE, LS, MW, MZ, NA, SD, SL, SZ, TZ, UG, ZM, ZW), eurasisches (AM, AZ, BY, KG, KZ, MD, RU, TJ, TM), europäisches (AT, BE, BG, CH, CY, CZ, DE, DK, EE, ES, FI, FR, GB, GR, HU, IE, IS, IT, LT, LU, MC, NL,

Veröffentlicht:

— mit internationalem Recherchenbericht

Zur Erklärung der Zweibuchstaben-Codes und der anderen Abkürzungen wird auf die Erklärungen ("Guidance Notes on Codes and Abbreviations") am Anfang jeder regulären Ausgabe der PCT-Gazette verwiesen.

Verfahren und Vorrichtung zur Erzeugung von Duft- und/oder Aromakompositionen

Technisches Gebiet

- 5 Die Erfindung betrifft ein Verfahren zur Erzeugung von Duft- und/oder Aromakompositionen sowie eine Vorrichtung zur Durchführung dieses Verfahrens.

Stand der Technik

- 10 In der parfümistischen und flavoristischen Praxis besteht ein ständiger Bedarf an neuen bzw. abgewandelten Düften und Aromen, welche den verschiedensten Anforderungen entsprechen müssen. Die diesbezügliche generelle Problematik ist beispielsweise in der DE 101 44 816 A1 beschrieben. Insbesondere wird die Suche nach geeigneten Düften und
- 15 Aromen dadurch erschwert, dass die Zusammenhänge zwischen der Duft- bzw. Aromawahrnehmung einerseits und der chemischen Struktur des Duft- bzw. Aromastoffes nicht hinreichend bekannt sind. Ausserdem zeigt sich, dass häufig bereits geringfügige Änderungen am strukturellen Aufbau bekannter Duft- oder Aromastoffe starke Änderungen der olfakto-
- 20 rischen bzw. geschmacklichen Eigenschaften bewirken können. Noch komplexer sind die Zusammenhänge bei den häufig verwendeten Duft- und Aromakompositionen, die aus einer Mischung mehrerer Duft- bzw. Aromastoffe gebildet sind.
- 25 In der EP 1 271 140 A1 ist ein Verfahren zur Bestimmung von sensorischen Attributen von Nahrungsmitteln mit einer dispersen Lipidphase beschrieben. Dabei wird eine Probe des Nahrungsmittels in eine Umgebung gebracht, welche soweit wie möglich den Bedingungen im Mund bei der Einnahme des Nahrungsmittels entspricht. Aufgrund der räumli-
- 30 chen Verteilung der Lipidphase unter diesen Bedingungen wird alsdann eine Voraussage der sensorischen Attribute erstellt. Eine allgemeine

Voraussage der sensorischen Eigenschaften von Duft- oder Aromakompositionen ist damit jedoch nicht möglich. Zudem sind in der EP 1 271 140 A1 die in der parfümistischen und flavoristischen Praxis sich stellenden Fragen der Handhabung von bekannten sensorischen Attributen im Hinblick auf deren praktische Nutzung, insbesondere zur Herstellung neuer Kreationen, die einem vorgegebenen sensorischen Profil möglichst nahe kommen, nicht angesprochen.

Schon vor geraumer Zeit wurden verschiedene Bewertungsinstrumente entwickelt, um die komplexen Eindrücke und Zusammenhänge bei der Quantifizierung von sensorischen Eigenschaften auf eine möglichst objektive Basis zu stellen. Die um 1974 eingeführte quantitative deskriptive Analyse (QDA) wurde in der Folge weiterentwickelt, beispielsweise zur sogenannten QFP-Methode ("Quantitative Flavor Profiling"), siehe dazu XP008033289 (C.R. Stanpanoni, Quantitative flavor profiling. An effective tool in flavor perception. Food Marketing and Technology 1993, Sensory Dep., Givaudan-Roure Flavors Ltd., Dübendorf, Schweiz, Bd. 7, Nr. 1, Februar 1993, S. 4 - 8). Solche Verfahren erlauben wohl eine von den eingesetzten Prüfpersonen weitgehend unabhängige Beurteilung und Beschreibung von Duft- und/oder Aromakompositionen; eine Umsetzung dieser Methodik zu einem operationell klar definierten Konzept für die Entwicklung und Erzeugung neuer Duft- und/oder Aromakompositionen (nachfolgend auch kollektiv als "Kompositionen" bezeichnet) wurde jedoch bislang nicht beschrieben.

25

Darstellung der Erfindung

Aufgabe der Erfindung ist es, ein Verfahren zur Erzeugung von Duft- und/oder Aromakompositionen anzugeben, mit dem die obigen Nachteile und Begrenzungen vermieden werden. Diese Aufgabe wird erfindungsgemäss durch das im Anspruch 1 definierte Verfahren sowie durch die im Anspruch 9 definierte Vorrichtung gelöst.

30

Beim erfindungsgemässen Verfahren geht man von einer Kompositions-Datenbank aus, welche für eine Gruppe von Basis-Kompositionen eine entsprechende Anzahl von zugeordneten Rezepturvektoren und Attributvektoren enthält. Jede der besagten Basis-Kompositionen ist durch Vermischen von vorgegebenen Stoffkomponenten herstellbar, wobei die Mengenanteile der einzelnen Stoffkomponenten durch einen entsprechenden Rezepturvektor dargestellt sind. Ausserdem liegen Bewertungsergebnisse bezüglich der Ausprägung ausgewählter sensorischer Attribute der Basis-Kompositionen vor, welche für jede der Basis-Kompositionen in Form eines zugeordneten Attributvektors dargestellt sind. Das erfindungsgemässe Verfahren umfasst folgende Schritte:

- a) Vorgeben eines Ziel-Attributvektors;
- b) Bestimmen eines Operators, welcher zumindest in einer Umgebung des Ziel-Attributvektors eine Transformation von Rezepturvektoren auf Attributvektoren bewerkstelligt;
- c) Ermitteln eines Ziel-Rezepturvektors mit der Massgabe, dass er unter Anwendung des besagten Operators zum Ziel-Attributvektor transformiert wird;
- d) Vermischen der vorgegebenen Stoffkomponenten mit Mengenanteilen gemäss dem Ziel-Rezepturvektor.

Als "Stoffkomponenten" im vorliegenden Zusammenhang sind nebst verschiedenen Duft- und/oder Aromastoffen auch die je nach Anwendung erforderlichen Lösungsmittel, Trägersubstanzen und dergleichen zu verstehen.

Als "Rezepturvektor" wird eine geordnete Reihe von Zahlenwerten verstanden, welche die Mengenteile der Stoffkomponenten angibt, die zur Bildung einer Duft- und/oder Aromakomposition verwendet wurden. Dabei gibt beispielsweise die m-te Komponente (im algebraischen Sinn) des Rezepturvektors der n-ten Komposition an, welchen Mengenteil die Stoffkomponente "m" in der besagten Komposition "n" aufweist.

Analog zu den Rezepturvektoren ist der "Attributvektor" als geordnete Reihe von Zahlenwerten darstellbar, welche die numerischen Bewertungsergebnisse der einzelnen sensorischen Attribute angeben.

Das erfindungsgemäße Verfahren verwendet eine Kompositions-Datenbank, welche Informationen für eine Gruppe von Basis-Kompositionen umfasst, wobei für jede Basis-Komposition einerseits die Zusammensetzung – ausgedrückt in Form des Rezepturvektors – und andererseits die sensorischen Attribute – ausgedrückt in Form des Attributvektors – abgespeichert sind.

Gestützt auf diese Kompositions-Datenbank kann eine Duft- und/oder Aromakomposition mit einer gewünschten Attributausprägung erzeugt werden. Dabei werden die gewünschten bzw. angestrebten sensorischen Attribute in Form einer als "Ziel-Attributvektor" bezeichneten geordneten Reihe von Zahlenwerten dargestellt, welche die gewünschten numerischen Werte der einzelnen sensorischen Attribute angeben. In der Folge gilt es, einen "Ziel-Rezepturvektor" zu bestimmen, welcher als Mischvorschrift für die gesuchte Komposition zu verstehen ist. Zu diesem Zweck werden zumindest die dem abgewandelten Attributvektor am nächsten liegenden Attributvektoren, die bereits in der Kompositions-Datenbank gespeichert sind und für die demzufolge auch bereits je ein zugehöriger Rezepturvektor bekannt ist, herangezogen. Anhand der bekannten Relation zwischen diesen Attributvektoren und Rezepturvektoren wird ein

- Operator ermittelt, der zumindest in einer Umgebung des abgewandelten Attributvektors eine Transformation von Rezepturvektoren auf Attributvektoren bewerkstelligt. Anschliessend wird nach dem Ziel-Rezepturvektor gesucht, wobei dieser die Eigenschaft haben soll, dass er unter
- 5 Anwendung des zuvor ermittelten Operators zum gewünschten Ziel-Attributvektor transformiert wird. Zum Schluss wird durch Vermischen der vorgegebenen Stoffkomponenten mit Mengenanteilen gemäss dem Ziel-Rezepturvektor die gesuchte Komposition gebildet.
- 10 Im vorliegenden Zusammenhang ist zwar von einem Verfahren zur Erzeugung von Kompositionen die Rede, das insbesondere zur Kreation einer neuen, bislang nicht bekannten Komposition verwendet werden kann. Da sich das Verfahren auf eine Kompositions-Datenbank mit In-
- 15 formationen zu einer Anzahl von Basis-Kompositionen stützt, kann jedoch die "Erzeugung" ebenso als "Abwandlung" einer bereits charakterisierten Komposition verstanden werden, d.h. bei der Vorgabe des Ziel-Attributvektors wird man oftmals vom Attributvektor einer der Basis-
- 20 Kompositionen ausgehen und diesen in eine gewünschte Richtung abwandeln. Vor diesem Hintergrund werden nachfolgend die Begriffe "Erzeugung" und "Abwandlung" als äquivalent verwendet.

- Eine weitere Aufgabe der Erfindung ist es, eine Vorrichtung zur Durchführung des erfindungsgemässen Verfahrens anzugeben. Gelöst wird diese Aufgabe durch die im Anspruch 9 definierte Vorrichtung. Die erfin-
- 25 dungsgemässe Vorrichtung weist eine Datenverarbeitungseinheit sowie eine von dieser steuerbare Mischvorrichtung auf, wobei die Datenverarbeitungseinheit Mittel zur Eingabe, Speicherung und Abfrage von mindestens einer Kompositions-Datenbank sowie Mittel zur Bestimmung von Abbildungsoperatoren, Mittel zur Eingabe von Attributvektoren, Mittel zur
- 30 Berechnung von abgewandelten Rezepturvektoren und Mittel zur Übertragung von durch die Rezepturvektoren geprägten Steuerungssignalen

an die Mischvorrichtung umfasst. Die Mischvorrichtung weist folgende Bestandteile auf:

- 5 a) eine Vielzahl von mit einzelnen Stoffkomponenten befüllbaren Vorratsbehältern;
- b) eine Vielzahl von Aufnahmebehältern;
- 10 c) eine steuerbare Zuführvorrichtung, um vorgegebene Mengen einzelner Stoffkomponenten von den entsprechenden Vorratsbehältern in die Aufnahmebehälter zu bringen zur Bildung einer Duft- und/oder Aromakomposition.

Vorteilhafte Ausgestaltungen der Erfindung sind in den abhängigen Ansprüchen definiert.

Eine bevorzugte Art, die Kompositions-Datenbank zu erzeugen, ist im Anspruch 2 definiert, welcher folgende Verfahrensschritte umfasst:

- 20 a) Bereitstellen der Gruppe von Basis-Kompositionen durch Vermischen der Stoffkomponenten in Mengenanteilen gemäss dem einer jeden Basis-Komposition zugeordneten Rezepturvektor;
- b) quantitative Bewertung einer jeden Basis-Komposition bezüglich der
25 ausgewählten sensorischen Attribute und Bildung des zugeordneten Attributvektors; und
- c) Bildung der Kompositions-Datenbank durch Speicherung der Rezepturvektoren und der Attributvektoren derart, dass für jede Basis-
30 Komposition die ihr zugeordneten Vektoren in Relation zueinander und zur Basis-Komposition abrufbar sind.

Dadurch, dass für jede Komposition die ihr zugeordneten Vektoren in Relation zueinander und zur Komposition abrufbar sind, können die an sich hochkomplexen Zusammenhänge zwischen der Zusammensetzung und den sensorischen Attributen von Duft- und/oder Aromakompositionen in systematischer Art und Weise erfasst werden und stehen für weitergehende Analysen zur Verfügung.

Die Bewertung sensorischer Attribute von Duft- und/oder Aromakompositionen wird bekanntlich dadurch erschwert, dass eine sensorische Bewertung durch einzelne Personen oftmals erhebliche Abweichungen aufgrund subjektiver Einflussfaktoren zeigt. Vorzugsweise wird deshalb ein qualifizierbares Vorgehen angewandt. Insbesondere kann dies gemäss Anspruch 3 mittels quantitativer deskriptiver Analyse vorgenommen werden.

Zweckmässigerweise wird für die Bildung des Attributvektors nur ein ausgewählter Teil der aus der quantitativen Bewertung hervorgehenden Attribute verwendet. Die Auswahl dieser Attribute wird gemäss Anspruch 4 vorteilhafterweise mittels einer Faktorenanalyse vorgenommen.

Die Ermittlung eines Operators, der eine Transformation von Rezepturvektoren auf Attributvektoren bewerkstelligt, kann dadurch erschwert sein, dass unter Umständen mehrere sehr unterschiedliche Rezepturen zu Kompositionen mit sehr ähnlichen sensorischen Attributen führen. Vorteilhafterweise wird deshalb das Verfahren nach Anspruch 5 angewendet, bei dem mittels multipler Regression und/oder neuronaler Netze und/oder eines Expertensystems die bijektive Relation zwischen Attribut- und Rezepturvektoren der Kompositionsdatenbank verwendet wird, um den gesuchten Operator aufgrund der lokalen Situation in der Umgebung eines abgewandelten Attributvektors zu ermitteln.

Bei der Bereitstellung einer Gruppe von Duft- und/oder Aromakompositionen ist es zweckmässig, aufbauend auf einigen als Grundlage dienenden Stoffkomponenten, welche eine herausragende Duft- bzw. Geschmacksnote definieren, durch wahlweise Zugabe weiterer Stoffkomponenten eine Reihe von Kompositionen mit leicht unterschiedlichen sensorischen Attributen aufzubauen. Grundsätzlich können hierfür verschiedene Vorgehensweisen angewandt werden. Insbesondere kann dies gemäss Anspruch 6 in vorteilhafter Weise mittels statistischer Versuchsplanung durchgeführt werden. Eine hierfür ausgestattete Vorrichtung ist im Anspruch 9 definiert. Die dabei vorgesehenen Mittel zur Erzeugung von Rezepturvektoren können insbesondere durch ein programmierbares Rezepturmodul gebildet sein, das mit Mitteln zur Dateneingabe, Datenverarbeitung und Datenausgabe sowie mit Speichermitteln, namentlich zur Speicherung der erzeugten Rezepturvektoren im Rahmen der Kompositions-Datenbank ausgestattet ist.

Für die Suche nach einer Komposition mit gewünschten sensorischen Attributen wird zweckmässigerweise ein entsprechender Attributvektor vorgegeben, der insbesondere als Abwandlung eines bereits in der Kompositions-Datenbank vorhandenen Attributvektors angesehen werden kann. Insbesondere kann die Abwandlung darin bestehen, dass ein bestimmtes Attribut verstärkt oder abgeschwächt werden soll. Vorteilhafterweise wird eine derartige Abwandlung auf interaktive Weise anhand geeigneter Visualisierungs- und Eingabemittel, beispielsweise über Bildschirmmonitor und Computer-Maus und dergleichen vorgenommen. Sofern der Wunsch besteht, eine vorgegebene Duft- und/oder Aromakomposition unbekannter Zusammensetzung nachzubilden, kann gemäss Anspruch 7 ein abgewandelter Attributvektor dadurch bestimmt werden, dass für die besagte Komposition eine Attributbewertung, beispielsweise gemäss Anspruch 3 mittels quantitativer deskriptiver Analyse, vorgenommen wird.

Zur Visualisierung und Bearbeitung von Attributvektoren sind an sich die verschiedensten Darstellungsarten möglich. Vorteilhafterweise werden die Attributvektoren gemäss Anspruch 8 in Form von Polardiagrammen, insbesondere als so genannte "Spiderwebs" dargestellt. Dabei ist jedem Attribut ein von einem gemeinsamen Zentrum ausgehender Strahlabschnitt zugeordnet, dessen Länge ein Mass für die Ausprägung des betreffenden Attributs ist. Vorteilhafterweise sind die Strahlen winkelmässig äquidistant angeordnet.

10 Kurze Beschreibung der Zeichnungen

Ausführungsbeispiele der Erfindung werden nachfolgend anhand der Zeichnungen näher beschrieben, dabei zeigen:

15 Fig. 1 eine Vorrichtung zur Erzeugung von Duft- und/oder Aromakompositionen, in schematischer Darstellung;

Fig. 2 eine schematische Darstellung des Vorgehens bei der Entwicklung eines Moduls;

20 Fig. 3 eine schematische Darstellung von sechs Kompositionen in einer durch zwei Attribute a und b aufgespannten Ebene;

25 Fig. 4 eine schematische Darstellung der Bestimmung von Zusammenhängen zwischen den Mengenanteilen von Stoffkomponenten und den Attributsausprägungen einer Komposition;

30 Fig. 5 grafische Darstellung des Zusammenhangs zwischen der Ausprägung des Aromas "Pfirsicharoma" und dem Mengenanteil der Stoffkomponente "Butylacetat" und zugehörige Regressionsgerade;

Fig. 6 eine Darstellung des Attributvektors einer Komposition als Polardiagramm.

Wege zur Ausführung der Erfindung

5 Die in der Figur 1 dargestellte Vorrichtung zur Erzeugung von Duft- und/oder Aromakompositionen umfasst eine Datenverarbeitungseinheit 2 und eine von dieser steuerbare Mischvorrichtung 4. Die Mischvorrichtung 4 weist eine Vielzahl von mit einzelnen Stoffkomponenten befüllbaren Vorratsbehältern 6, 6a, etc. - beispielsweise kleine Glasflaschen - sowie
10 eine Vielzahl von Aufnahmebehältern 8, 8a, 8b, 8c, etc. - beispielsweise Reagenzgläser - für Duft- und/oder Aromakompositionen auf.

Eine steuerbare Zuführvorrichtung 10 umfasst eine von einer nicht dargestellten Druckgasquelle versorgte Druckgasleitung 12, von welcher
15 aus zu den einzelnen Vorratsbehältern 6, 6a, etc. führende Zuführleitungen 14, 14a, etc. abgezweigt sind. Des Weiteren ist ein jeder Vorratsbehälter 6, 6a, etc. mit einer Steigleitung 18, 18a, etc. ausgestattet, die im Wesentlichen bis zum Boden des betreffenden Vorratsbehälters ragt. Die einzelnen Steigleitungen 18, 18a, etc. sind an ihren von den Vorratsbehältern abgewandten, distalen Enden 20, 20a, etc. zu einem Füllarm 22
20 gebündelt, der zu einer Abfüllstation 24 gehört. In jeder Steigleitung 18, 18a, etc. befindet sich zudem ein steuerbares Ventil 16, 16a, etc.. Die Zuführleitung 14, 14a, etc. und die Steigleitung 18, 18a, etc. eines jeden Vorratsbehälters 6, 6a, etc. sind durch einen Behälterdeckel 26, 26a, etc. geführt, der einen druckdichten Abschluss bildet. Um eine gewisse
25 Menge der in einem Vorratsbehälter 6 befindlichen Stoffkomponente in einen Aufnahmebehälter 8 zu bringen, wird das entsprechende Ventil 16 in der Steigleitung 18 geöffnet. Durch Wirkung des im Vorratsbehälter 6 herrschenden Überdrucks wird die Stoffkomponente in die Steigleitung
30 18, durch das Ventil 16 hindurch und bis zum Füllarm 22 gedrängt.

Weiterhin umfasst die Mischvorrichtung 4 einen im Wesentlichen horizontal angeordneten Drehtisch 28, dessen Peripherie mit einer Vielzahl von über den Umfang verteilten Öffnungen 30 versehen ist. Wie aus der Figur 1 hervorgeht, sind die einzelnen Aufnahmebehälter 8, 8a, 8b, 8c
5 hängend am Drehtisch 28 in den einzelnen Öffnungen 30 angeordnet. Zu diesem Zweck weisen die Aufnahmebehälter 8, 8a, 8b, 8c etc. einen oberen Kragen auf, welcher die Weite der Öffnungen 30 übertrifft und damit eine Auflagefläche für die hängende Lagerung der Aufnahmebe-
hälter 8, 8a, 8b, 8c, etc. bildet. Der Drehtisch 28 ist um seine Mittelach-
10 se A drehbar und kann zudem von der hier dargestellten unteren Stellung in Achsenrichtung in eine obere Stellung verschoben werden. Eine im Wesentlichen coaxial oberhalb des Drehtisches 28 befindliche Deckscheibe 32 bildet eine obere Abdeckung für die im Drehtisch 28 hängen-
den Aufnahmebehälter 8a, 8b, 8c, etc.; aus Anschaulichkeitsgründen ist
15 jedoch die Deckscheibe 32 in der Figur 1 gegenüber dem Drehtisch 28 etwas angehoben dargestellt.

Die Abfüllstation 24 beinhaltet überdies eine Wägevorrichtung 34, mittels welcher die in einen darauf stehenden Aufnahmebehälter 8 zugeführten
20 Mengen der verschiedenen Stoffkomponenten exakt bestimmbar sind. Wie aus der Figur 1 ersichtlich, sind der Füllarm 22, der zu befüllende Aufnahmebehälter 8 und die Wägevorrichtung 34 im Wesentlichen senkrecht untereinander angeordnet. Eine Aussparung 36 in der Deckscheibe 32 lässt einen Durchgang für den auf der Wägevorrichtung 34 stehenden
25 Aufnahmebehälter 8 frei.

Nach erfolgtem Befüllen des Aufnahmebehälters 8 werden zunächst die Deckscheibe 32 und der Füllarm 22 bis zur Freigabe des Aufnahmebe-
hälters 8 angehoben; ausserdem wird der Drehtisch 28 hochgefahren bis
30 der Aufnahmebehälter 8 daran hängend ist. Anschliessend wird der Drehtisch 28 soweit um die Mittelachse A gedreht, bis sich der nächste

zu befüllende Aufnahmebehälter 8a über der Wägevorrichtung 24 befindet. Danach wird der Drehtisch 28 abgesenkt, wodurch der Aufnahmebehälter 8a auf die Wägevorrichtung 24 zu stehen kommt. Schliesslich wird die Deckscheibe 32 auf die Oberteile der im Drehtisch 28 hängen-
5 den Aufnahmebehälter 8, 8b, 8c abgesenkt; ausserdem wird der Füllarm 22 wieder soweit abgesenkt, dass sich die distalen Enden 20, 20a, etc. der Steigleitungen 18, 18a, etc. innerhalb oder knapp oberhalb der Mündung des Aufnahmebehälters 8a befinden, der nunmehr befüllt werden kann.

10

Die zuvor beschriebenen Bewegungen von Drehtisch 28, Füllarm 22 und Deckscheibe 32 werden durch eine lediglich schematisch dargestellte Antriebsgruppe 38 bewerkstelligt, die von der Datenverarbeitungseinheit 2 gesteuert wird.

15

Es ist zweckmässig, austauschbare unterschiedliche Drehtische vorzusehen. Beispielsweise kann ein erster Drehtisch für 64 kleinere, mit bis zu 20 g befüllbaren Behälter und ein zweiter Drehtisch für 28 grössere, mit bis zu 100 g befüllbaren Behälter vorgesehen werden.

20

Zweckmässigerweise umfasst die Vorrichtung mehrere, beispielsweise vier Abfüllstationen und eine entsprechende Anzahl von Wägevorrichtungen, Füllarme, Ventilgruppen etc., wodurch das Befüllen einer grösseren Anzahl von Aufnahmebehältern entsprechend beschleunigt werden
25 kann.

Die Datenverarbeitungseinheit 2 weist an sich bekannte Funktionsgruppen wie Computer, Speichermedien, Bildschirmmonitor, Computermouse und dergleichen auf, welche zur Eingabe, Speicherung, Verarbeitung
30 und Abfrage von Daten dienen. Wie nachfolgend anhand der massgeblichen Verfahrensschritte näher erläutert, umfasst die Datenverarbei-

tungseinheit 2 insbesondere Mittel zur Eingabe, Speicherung, Verarbeitung und Abfrage von mindestens einer Kompositions-Datenbank sowie Mittel zur Bestimmung von Abbildungsoperatoren, Mittel zur Eingabe von Attributvektoren, Mittel zur Berechnung von abgewandelten Rezeptur-
5 vektoren und Mittel zur Übertragung von durch die Rezepturvektoren geprägten Steuerungssignalen an die Mischvorrichtung 4.

Mit der oben beschriebenen Vorrichtung lassen sich Rezepte und sensorische Daten von Duft- und/oder Aromakompositionen - nachfolgend als
10 "Kompositionen" bezeichnet - verwalten. Der Anwender kann die vorhandenen Datenbanken gezielt nach sensorischen Eigenschaften durchforsten und sich die Rezepte der Kompositionen anzeigen lassen. Die Rezepturen lassen sich, wenn sie nicht die geforderten sensorischen Eigenschaften besitzen, mit Hilfe einer Abwandlungsprozedur modifizieren.
15 Dabei werden mehrere neue Rezepte erstellt, welche den gewünschten sensorischen Eigenschaften genügen sollten. Grundlage der Abwandlungsprozedur sind die bereits bestehenden Basis-Kompositionen und deren sensorischen Bewertungen. Die Erhebung und Auswertung dieser Daten sowie die Funktionsweise der Abwandlungsprozedur
20 werden nachfolgend näher beschrieben.

In der praktischen Anwendung hat es sich bewährt, Gruppen von Kompositionen als sogenannte "Module" zu betrachten, wobei ein jedes Modul einer gewünschten Duft- oder Aromarichtung zugehört. Die Entwicklung eines derartigen Moduls ist in der Figur 2 dargestellt. Um beispielsweise ein Modul für das Aroma von Mango zu erstellen, werden zunächst Fachliteratur und Datenbanken nach Komponenten durchforstet,
25 die schon in Mangoaromen eingesetzt wurden oder natürlicherweise in der Frucht vorkommen. Nach erfolgter Auswahl von beispielsweise 10 bis 20 solcher Stoffkomponenten wird eine Gruppe von Kompositionen bereitgestellt, indem jeweils einige Stoffkomponenten miteinander ver-
30

mischt werden. Dabei werden je nach Anwendungsbereich neben den Aromakomponenten auch übliche Lösungsmittel, Trägersubstanzen und dergleichen mit vermischt. Mit der hier beschriebenen Vorrichtung werden die Stoffkomponenten in Reagenzgläser dosiert, die 8 bis 15 Gramm fassen, wobei bis zu 64 Kompositionen gleichzeitig hergestellt werden können. Jede so hergestellte Komposition ist durch einen Rezepturvektor charakterisiert, welcher die Mengenanteile der zur Bildung der Komposition verwendeten Stoffkomponenten angibt.

- 10 In algebraischer Schreibweise lässt sich die Bildung von beispielsweise 14 Kompositionen K_1 bis K_{14} aus beispielsweise 33 Stoffkomponenten S_1 bis S_{33} wie folgt darstellen:

$$(K) = R (S) \quad (1)$$

15

wobei der Kompositionsvektor (K) ein Spaltenvektor der Dimension 14 und der Stoffkomponentenvektor (S) ein Spaltenvektor der Dimension 33 ist und wobei die Rezepturmatrix R eine Matrix mit 14 Zeilen und 33 Spalten ist. Das Matrixelement R_{ij} stellt den Mengenanteil der Stoffkomponente S_j in der Komposition K_i dar. Ebenso kann die i-te Zeile der Rezepturmatrix R als Zeilenvektor $(R_i)^T$ interpretiert werden, der die Zusammensetzung der Komposition K_i darstellt, weshalb $(R_i)^T$ auch als Rezepturvektor der Komposition K_i bezeichnet wird. (In der hier verwendeten Notation werden Zeilenvektoren mit dem Index T für "transponiert" dargestellt).

25

Ein Ausschnitt einer Rezepturmatrix mit Mengenanteilen in Gewichtsprozent ist nachfolgend in Tabelle 1 dargestellt.

Tabelle 1: Ausschnitt einer Rezepturmatrix

	S1 2-Isopropyl-4- methylthiazol	S2 3-Hexenyl- azetat	. . .	S10 Ethanol	. . .	S33 Vanillin
K1	0.0072	0		99.2267	. . .	0
K2	0.0066	0		99.2079	. . .	0.0023
.
.
.
K14	0	0.1454		99.4560	. . .	0

Die so bereitgestellten Kompositionen werden anschliessend bezüglich
 5 ihrer sensorischen Attribute bewertet. Zweckmässigerweise kann in einer
 ersten Phase eine Vorausscheidung von ungeeignet erscheinenden
 Kompositionen wie auch eine Verfeinerung von geeignet erscheinenden
 Kompositionen vorgenommen werden. Zu diesem Zweck werden die
 Kompositionen bezüglich ihrer Aromacharakteristik beschnüffelt. Die Re-
 10 zepte der klar erkennbaren Mangoaromen werden verfeinert, produziert
 und wieder getestet. Die guten Mangoaromen werden danach in einer
 sauren Zuckerwasserlösung verkostet. Es kommt vor, dass gut riechen-
 de Aromen nicht dementsprechend gut schmecken und somit ebenfalls
 auszuscheiden sind.

15

Für die auf obige Weise ausgewählten "besten" Mangoaromen wird in
 der Folge eine quantitative Bewertung von sensorischen Attributen vor-
 genommen, wobei dies zweckmässigerweise in einem spezialisierten
 Sensorik-Labor durchgeführt wird. Dabei wird zu jeder Komposition ein
 20 zugeordneter Attributvektor gebildet, welcher den Bewertungsergebnis-
 sen der einzelnen sensorischen Attribute entspricht. In Analogie zu den
 oben eingeführten Rezepturvektoren $(R_i)^T$ kann der Attributvektor einer
 Komposition K_i als Zeilenvektor $(A_m)^T$ geschrieben werden, bzw. die At-
 tributvektoren einer Gruppe von Kompositionen können als Attributmatrix

A dargestellt werden, wobei das Matrixelement A_{im} die Ausprägung des Attributes m in der Komposition K_i darstellt. Ein Ausschnitt einer Attributmatrix mit Merkmalsausprägungen auf einer Normskala von 0 bis 15 ist nachfolgend in Tabelle 2 dargestellt.

5

Tabelle 2: Ausschnitt einer Attributmatrix

	A1 blumig im Aroma	A2 fruchtig im Aroma	. . .	A58 hölzern im Aroma
K1	6.92	4.39		2.03
K2	7.54	4.75		2.18
.	.	.		.
.	.	.		.
.	.	.		.
K14	6.43	3.63		2.97

Zweckmässigerweise wird nun im Sinne einer Datenreduktion eine Fak-
 10 torenanalyse (engl. auch "principal component analysis (PCA)" genannt)
 durchgeführt. Dabei werden Attribute auf Ähnlichkeiten in ihrer Struktur
 innerhalb der Attributmatrix untersucht. Pro extrahiertem Faktor wird ein
 Attribut ausgewählt, welches einerseits eine hohe Faktorladung hat und
 andererseits für die Aromarichtung am meisten Sinn macht. Nur die aus-
 15 gewählten Attribute können später im Rahmen des Abwandlungsverfah-
 rens gezielt verändert werden. Deshalb werden vor allem Attribute ge-
 wählt, die einen positiven Effekt auf das betrachtete Aroma bzw. den be-
 trachteten Duft haben. Es dürfte ja kaum erwünscht sein, beispielsweise
 ein bestehendes Mangoaroma später in Richtung einer stärker ausge-
 20prägten Modrigkeit oder Hölzigkeit abzuwandeln. In der Praxis werden
 pro Modul ungefähr zehn sensorische Attribute ausgewählt. Dement-
 sprechend wird die Dimensionalität der Attributvektoren $(A_m)^T$ reduziert,
 indem die Anzahl von Vektorkomponenten beispielsweise von 50 auf 10
 reduziert wird.

Die verwendeten Rezepturvektoren sowie die ausgewählten Attributvektoren werden in einer Kompositions-Datenbank derart abgespeichert, dass für jede Komposition die ihr zugeordneten Vektoren in Relation zueinander und zur Komposition abrufbar sind.

5

Mit der oben beschriebenen Datenerhebung werden in einem multidimensionalen "Attributraum" einzelne Punkte bestimmt, wobei jede Komposition eines Moduls einem Punkt im besagten Attributraum entspricht. Dies ist schematisch in der Figur 3 für Kompositionen in einer durch zwei
10 Attribute aufgespannten Ebene dargestellt. Um eine gezielte Abwandlung der Attribute vornehmen zu können, sollten die sensorischen Attribute der bereitgestellten Kompositionen bezüglich ihrer einzelnen Attribute eine möglichst grosse Streuung aufweisen.

15 Im Hinblick auf eine Abwandlung einer bestehenden Komposition wird für das zugehörige Modul eine Attribut-Rezepturmatrix M erstellt. Das Matrixelement M_{mj} gibt dabei an, wie stark die Ausprägung des Attributes k durch den Mengenanteil der Stoffkomponente S_j geprägt wird. Diese Zusammenhänge werden beispielsweise mittels multipler linearer Regression und/oder neuronaler Netze und/oder eines Expertensystems er-
20 mittelt. Zweckmässigerweise werden die mit unterschiedlichen Methoden gewonnenen Ergebnisse miteinander verglichen und bei Bedarf abgeglichen. Dieses Verfahren ist schematisch in der Figur 4 dargestellt. Das Prinzip zur Bestimmung eines Matrixelementes M ist zudem in der Figur
25 5 veranschaulicht. Darin ist für jede der 14 Komponenten eines Moduls die Ausprägung des Attributs "blumig im Aroma" gegen den Mengenanteil der Stoffkomponente "Butylazetat" aufgetragen. Die durch lineare Regression ermittelte Trendlinie zeigt, dass das Attribut Pfirsicharoma mit zunehmendem Mengenanteil von Butylazetat stärker ausgeprägt
30 wird.

Ziel der vorgenannten Prozedur ist das Eruiere von Stoffkomponenten, die eine positive oder aber eine negative Hebelwirkung auf das interessierende Attribut haben. Eine positive Hebelwirkung bedeutet, dass die Erhöhung des Mengenanteils der betreffenden Stoffkomponente in einem Aromarezept zu einer verstärkten sensorischen Wahrnehmung des interessierenden Attributes führt. Eine negative Hebelwirkung bedeutet demgegenüber, dass zur Verstärkung der sensorischen Wahrnehmung des interessierenden Attributes der Mengenanteil der betreffenden Stoffkomponente erniedrigt werden muss.

Die Attribut-Rezepturmatrix M kann als Matrixdarstellung eines Operators verstanden werden, der zumindest in einem lokalen Bereich des Attributraumes eine Transformation von Rezepturvektoren auf Attributvektoren bewerkstelligt, was formell durch die folgende Gleichung ausgedrückt werden kann:

$$(A) = M (R) \quad (2)$$

worin (A) und (R) nun die Attribut- und Rezepturvektoren in Spaltendarstellung sind. Für eine bereits charakterisierte Komposition K_i mit zugehörigem Rezepturvektor (R_i) ergibt Gleichung (2) den zugehörigen Attributvektor (A_i) . Die erforderliche Lokalität der obigen Transformation bedeutet, dass die Gleichung (2) auch für eine gegenüber der Komposition K_i leicht abgewandelten Komposition K_i' in guter Näherung gilt. Anders formuliert heisst dies, dass die Anwendung der Rechenvorschrift (2) auf einen gegenüber (R_i) leicht abgewandelten Rezepturvektor $(R_i)'$ einen berechneten abgewandelten Attributvektor ergibt, der in guter Näherung dem Attributvektor $(A_i)'$ der abgewandelten Komposition K_i' entspricht. Wird nun in der Praxis eine neue Komposition mit vorgegebener Attributsausprägung gesucht, so ist im Prinzip das zur gerade geschilderten Prozedur inverse Problem zu lösen. Vorgegeben ist nunmehr der ge-

wünschte Attributvektor (A_{soll}) und gesucht ist ein zugehöriger Rezepturvektor (R_{soll}), welcher als Herstellungsvorschrift für die gesuchte Komposition verstanden werden kann. Zweckmässigerweise wird man für diese Suche von einer bereits charakterisierten Komposition ausgehen, deren

5 Attributsausprägung möglichst nahe bei der gewünschten ist. Es wird also eine Abwandlung einer bereits charakterisierten Komposition K_{ist} mit Rezepturvektor R_{ist} und Attributvektor A_{ist} vorgenommen.

Im einfachsten Fall könnte das Abwandlungsverfahren als sogenannte

10 "trial and error" Prozedur durchgeführt werden, d.h. man könnte beispielsweise mit Hilfe eines Zufallsgenerators eine Vielzahl von neuen Rezepturvektoren in der Umgebung von (R_{ist}) erzeugen und durch Anwendung von Gleichung (2) deren zugehörige Attributvektoren berechnen. Dies wäre solange zu wiederholen, bis ein Attributvektor gefunden

15 wird, der genügend nahe am gewünschten Attributvektor (A_{soll}) liegt. Sinnvoller ist es allerdings, für die Abwandlungsprozedur eine statistische Versuchsplanung zu verwenden. Eine mögliche Vorgehensweise wird nachfolgend näher erläutert.

20 Pro Attribut werden in der Regel vier bis zehn massgebliche Stoffkomponenten bestimmt. Sie werden nach ihrer Hebelwirkung positiv und negativ in die Kategorien 1 bis 3 eingeteilt, wobei Kategorie 1 der grössten Hebelwirkung und Kategorie 3 der kleinsten Hebelwirkung entspricht. In die Kategorie 1 und 2 werden jeweils nur eine positive und eine negative

25 Stoffkomponente eingeteilt, während der Kategorie 3 mehrere Stoffkomponenten zugeteilt werden können.

Die Tabelle 3 zeigt beispielhaft einen Ausschnitt der Resultate einer Datenauswertung aus einem Modul für Apfelaroma. Es sind die Attribute

30 "frisch im Geschmack" und "blumig im Aroma" und die dazu eruierten Stoffkomponenten aufgeführt, wobei die Stoffkomponenten codiert auf-

geführt sind. Wird zum Beispiel einem Apfelrezept die Stoffkomponente C335 zugegeben oder die Stoffkomponente C8 reduziert, sollte dieses Rezept blumiger im Geruch sein als das Basisrezept.

5 Tabelle 3: Ausschnitt der Datenauswertung eines Moduls für Apfelaroma

		frisch im Geschmack Stoffkomponente	blumig im Aroma Stoffkomponente
Positive Hebelwirkung	1.Kategorie	C13	C335
	2.Kategorie	C11	C345
	3.Kategorie		C21
			C164
			C348
Negative Hebelwirkung	1.Kategorie	C8	C163
	2.Kategorie	C350	C8
	3.Kategorie	C12	C11
		C14	C12
		C74	C167
		C163	C341
		C345	C423

Wie oben beschrieben, lässt sich eine gegebene Rezeptur auswählen und danach durch deren Abwandlung die Ausprägung eines bestimmten

10 Attributes gezielt verstärken. Dabei werden beispielsweise bis zu 14 neue Rezepturen nach einer eigens entwickelten Versuchsplanung erzeugt. Die Versuchsplanung sieht vor, dem Basisrezept die aus der Datenauswertung stammenden Stoffkomponenten zuzugeben oder zu reduzieren. In der Tabelle 4 ist der Ablauf der Versuchsplanung aufgezeigt.

15 In den ersten vier Rezepten werden die Konzentrationen derjenigen Stoffkomponenten mit einer positiven Hebelwirkung erhöht und bei den Rezepten 5 bis 8 werden die Konzentrationen der Stoffkomponenten mit einer negativen Hebelwirkung reduziert. Dabei können nur Stoffkomponenten reduziert werden, die in der Basisrezeptur enthalten sind. Ist also

- die Stoffkomponente mit negativer Hebelwirkung der Kategorie 2 in der Basisformulierung nicht enthalten, so wird die Rezeptur Nummer 6 nicht generiert. Stoffkomponenten mit positiver Hebelwirkung werden dagegen immer zugegeben. Die Rezepte 9 bis 14 werden durch die Kombination
- 5 der ersten acht Aktionen erstellt.

Tabelle 4: Statistische Versuchsplanung

Rezept Nr.	Aktionen	Beschreibung
1	A1	Zugabe der Komponente Kategorie 1
2	A2	Zugabe der Komponente Kategorie 2
3	A3	Zugabe der Komponenten Kategorie 1&2
4	A4	Zugabe der Komponenten aller Kategorien
5	S1	Reduktion der Komponente Kategorie 1
6	S2	Reduktion der Komponente Kategorie 2
7	S3	Reduktion der Komponenten Kategorie 1&2
8	S4	Reduktion der Komponenten aller Kategorien
9	A4 & S4	Aktion A4 & S4 zusammen
10	A4 & S3	Aktion A4 & S3 zusammen
11	A3 & S4	Aktion A3 & S4 zusammen
12	A1 & S1	Aktion A1 & S1 zusammen
13	A2 & S2	Aktion A2 & S2 zusammen
14	A3 & S2	Aktion A3 & S2 zusammen

- 10 Aus der Versuchsplanung geht demnach hervor, welche Stoffkomponenten erhöht oder reduziert werden müssen. Die absolute Masse dieser Änderungen muss jedoch für jede Stoffkomponente einzeln berechnet werden und wird wie folgt durchgeführt.
- 15 Zuerst wird für jede Stoffkomponente die Differenz zwischen dem maximalen je eingesetzten Mengenanteil R_{\max} und dem minimalen je eingesetzten Mengenanteil R_{\min} über alle Rezepturen des betrachteten Moduls

bestimmt. Das Ergebnis wird durch die Differenz zwischen der maximalen Ausprägung A_{\max} und der minimalen Ausprägung A_{\min} eines Attributs über alle Rezepturen des betrachteten Moduls dividiert:

5
$$x_1 = (R_{\max} - R_{\min}) / (A_{\max} - A_{\min}) \quad (3)$$

In einem weiteren Schritt wird der in der Basisrezeptur eingesetzte Mengenanteil R_{ist} der Stoffkomponente dividiert durch die sensorische Bewertung des Attributs der gewählten Rezeptur.

10
$$x_2 = R_{\text{ist}} / A_{\text{ist}} \quad (4)$$

Diese Berechnung entfällt, wenn die Stoffkomponente nicht in der Basisrezeptur vorhanden ist, da dann R_{ist} gleich Null ist.

15 Im nächsten Schritt wird der Mittelwert der beiden oben berechneten Werte berechnet.

20
$$x = (x_1 + x_2) / 2 \quad (5)$$

Diese Berechnung entfällt, wenn die zweite Berechnung entfällt. In diesem Fall ist $x = x_1$.

25 In einem letzten Schritt wird die Differenz zwischen der gewünschten Attributsausprägung A_{soll} und der sensorischen Bewertung A_{ist} des Attributs der gewählten Rezeptur mit dem Resultat von Gleichung (5) multipliziert:

30
$$\Delta R = x (A_{\text{soll}} - A_{\text{ist}}) \quad (6)$$

Das Ergebnis ΔR ist nun der Mengenanteil der betrachteten Stoffkomponente, welcher der Basisrezeptur dazugegeben oder in der Basisrezeptur reduziert wird. Falls ΔR negativ ist und der Betrag von ΔR den Mengenanteil R_{ist} der Stoffkomponente in der Basisrezeptur übersteigt, wird
5 diese Stoffkomponente aus dem Rezept gestrichen.

Die obige Berechnung ist auf eine Verstärkung eines Attributes ausgelegt, kann aber auf analoge Art und Weise auch für die Abschwächung eines Attributes verwendet werden.

10

Ein Beispiel für die Visualisierung des Attributvektors einer einzelnen Komposition in Form eines Polardiagrammes (auch "Spiderweb" genannt) ist in der Figur 6 wiedergegeben. Dabei ist jedem Attribut ein von einem gemeinsamen Zentrum ausgehender Strahlabschnitt zugeordnet,
15 dessen Länge ein Mass für die Ausprägung des betreffenden Attributes ist. Die Strahlen sind dabei winkelmässig äquidistant angeordnet. Bei der gezeigten Komposition ist das Attribut "Citrus" am wenigsten und das Attribut "Vanille" und "Frisch" am stärksten ausgeprägt. Eine derartige Darstellung ist für eine interaktive Abwandlung von Kompositionen
20 gut geeignet. Dabei kann beispielsweise mittels einer Computermouse das am Bildschirm dargestellte Polardiagramm gezielt verändert werden und damit ein abgewandelter Attributvektor für eine gewünschte neue Komposition vorgegeben werden.

Patentansprüche

1. Verfahren zur Erzeugung einer Duft- und/oder Aromakomposition, dadurch gekennzeichnet, dass man von einer Kompositions-
5 Datenbank ausgeht, die für eine Gruppe von Basis-Kompositionen, welche durch Vermischen von vorgegebenen Stoffkomponenten herstellbar sind, zugeordnete Rezepturvektoren und Attributvektoren enthält, wobei jeder Rezepturvektor die Mengenanteile der zur Bildung der zugeordneten Basis-Komposition erforderlichen Stoffkomponenten angibt und wobei jeder Attributvektor die Bewertungsergebnisse bezüglich ausgewählter sensorischer Attribute der zugeordneten Basis-Komposition angibt, und wobei das Verfahren folgende Schritte umfasst:
- 10
- 15 a) Vorgeben eines Ziel-Attributvektors;
- b) Bestimmen eines Operators, welcher zumindest in einer Umgebung des Ziel-Attributvektors eine Transformation von Rezepturvektoren auf Attributvektoren bewerkstelligt;
- 20
- c) Ermitteln eines Ziel-Rezepturvektors mit der Massgabe, dass er unter Anwendung des besagten Operators zum Ziel-Attributvektor transformiert wird;
- 25
- d) Vermischen der vorgegebenen Stoffkomponenten mit Mengenanteilen gemäss dem Ziel-Rezepturvektor.
2. Verfahren nach Anspruch 1, dadurch gekennzeichnet, dass die Kompositions-Datenbank durch folgende Schritte erzeugt wurde:

- a) Bereitstellen der Gruppe von Basis-Kompositionen durch Vermischen der Stoffkomponenten in Mengenanteilen gemäss dem einer jeden Basis-Komposition zugeordneten Rezepturvektor;
- 5 b) quantitative Bewertung einer jeden Basis-Komposition bezüglich der ausgewählten sensorischen Attribute und Bildung des zugeordneten Attributvektors; und
- 10 c) Bildung der Kompositions-Datenbank durch Speicherung der Rezepturvektoren und der Attributvektoren derart, dass für jede Basis-Komposition die ihr zugeordneten Vektoren in Relation zueinander und zur Basis-Komposition abrufbar sind.
- 15 3. Verfahren nach Anspruch 1 oder 2, dadurch gekennzeichnet, dass die Bewertung der sensorischen Attribute auf quantitativer deskriptiver Analyse beruht.
- 20 4. Verfahren nach einem der Ansprüche 1 bis 3, dadurch gekennzeichnet, dass die zur Bildung der Attributvektoren verwendeten Attribute mittels einer Faktorenanalyse ausgewählt sind.
- 25 5. Verfahren nach einem der Ansprüche 1 bis 4, dadurch gekennzeichnet, dass der Operator mittels multipler Regression und/oder neuraler Netze und/oder eines Expertensystems ermittelt wird.
6. Verfahren nach einem der Ansprüche 1 bis 5, dadurch gekennzeichnet, dass der Ziel-Rezepturvektor mittels statistischer Versuchspaltung bestimmt wird.

7. Verfahren nach einem der Ansprüche 1 bis 6, dadurch gekennzeichnet, dass der Ziel-Attributvektor durch Attributbewertung einer vorgegebenen Komposition bestimmt wird.
- 5 8. Verfahren nach einem der Ansprüche 1 bis 7, dadurch gekennzeichnet, dass Attributvektoren in Form von Polardiagrammen dargestellt werden.
- 10 9. Vorrichtung zur Durchführung des Verfahrens nach einem der Ansprüche 1 bis 8, mit einer Datenverarbeitungseinheit (2) sowie mit einer von dieser steuerbaren Mischvorrichtung (4), wobei die Datenverarbeitungseinheit (2) Mittel zur Eingabe, Speicherung und Abfrage von mindestens einer Kompositions-Datenbank sowie Mittel zur Bestimmung von Abbildungsoperatoren, Mittel zur Eingabe von Attributvektoren, Mittel zur Berechnung von Ziel-Rezepturvektoren und Mittel zur Übertragung von durch die Rezepturvektoren geprägten Steuerungssignalen an die Mischvorrichtung (4) umfasst, und wobei die Mischvorrichtung (4) folgende Bestandteile aufweist:
 - 20 a) eine Vielzahl von mit einzelnen Stoffkomponenten befüllbaren Vorratsbehältern (6, 6a);
 - b) eine Vielzahl von Aufnahmebehältern (8, 8a, 8b, 8c);
 - 25 c) eine steuerbare Zuführvorrichtung (10), um vorgegebene Mengen einzelner Stoffkomponenten von den entsprechenden Vorratsbehältern (6, 6a) in die Aufnahmebehälter (8, 8a, 8b, 8c) zu bringen zur Bildung einer Duft- und/oder Aromakomposition.

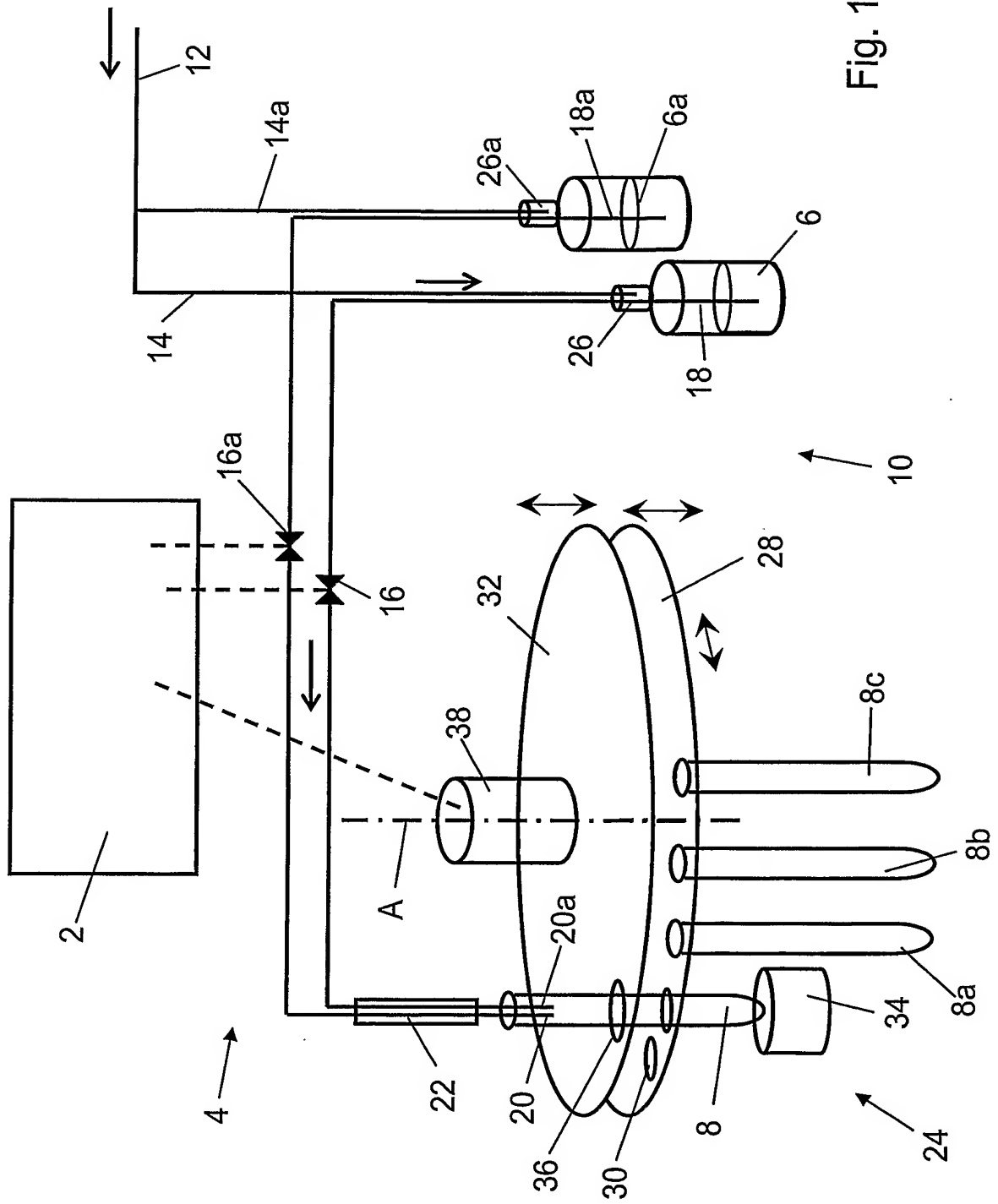


Fig. 1

2/3

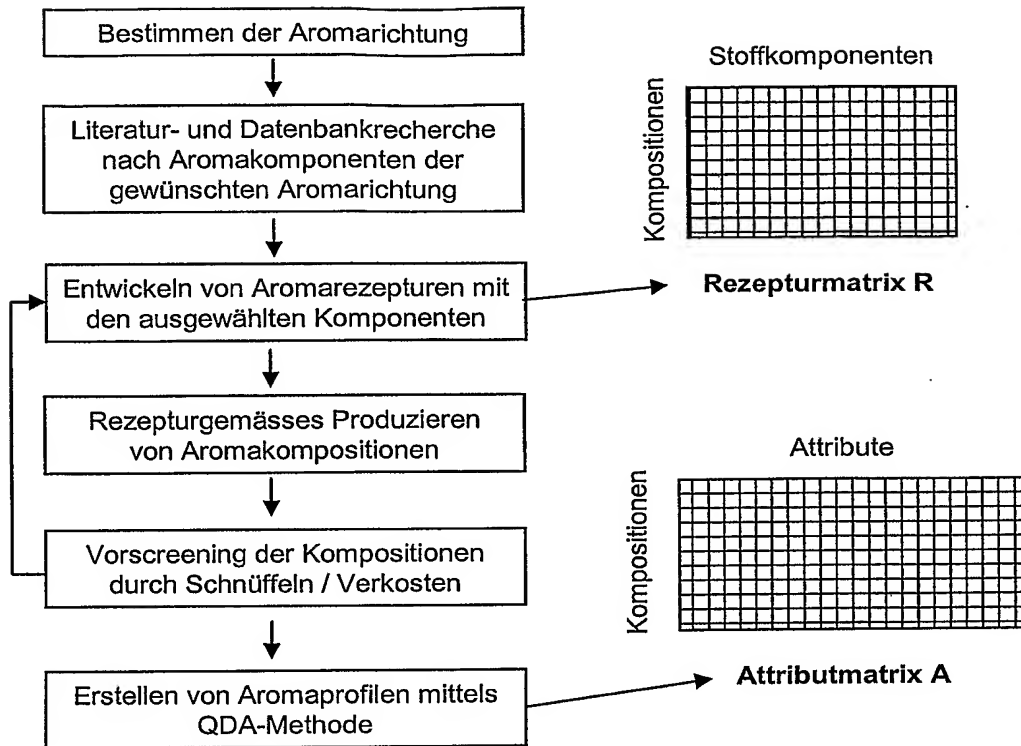


Fig. 2

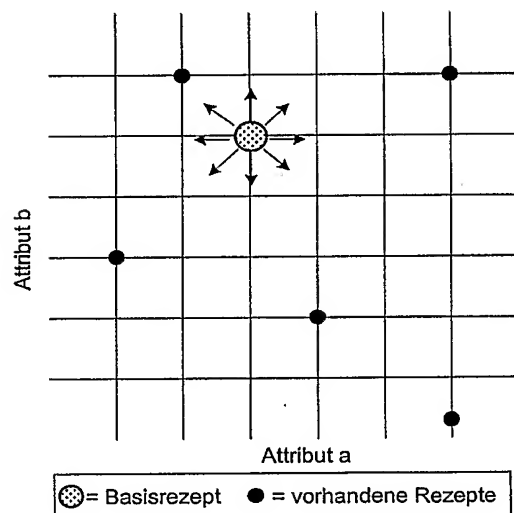
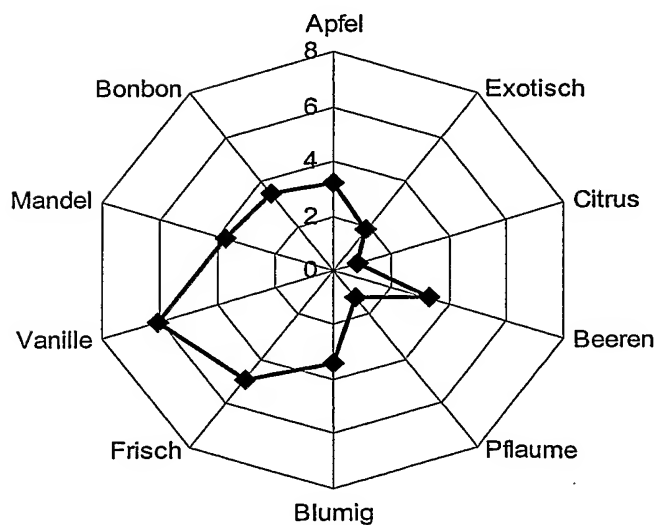
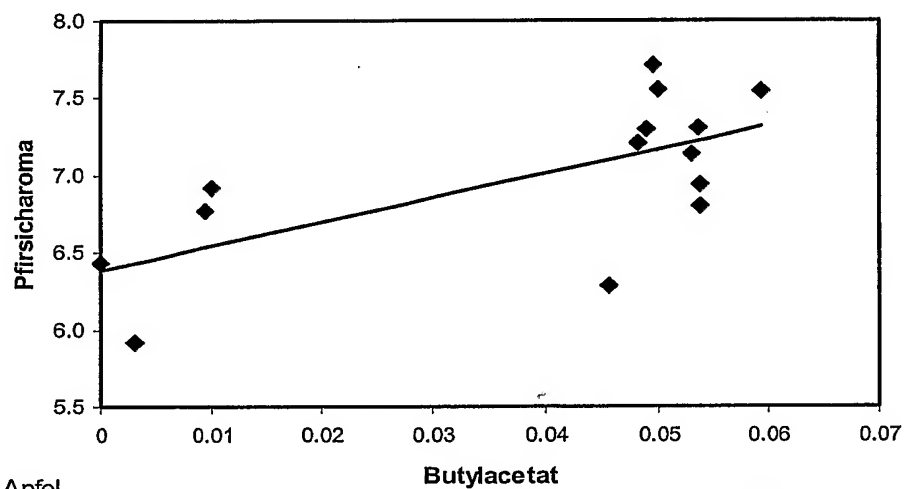
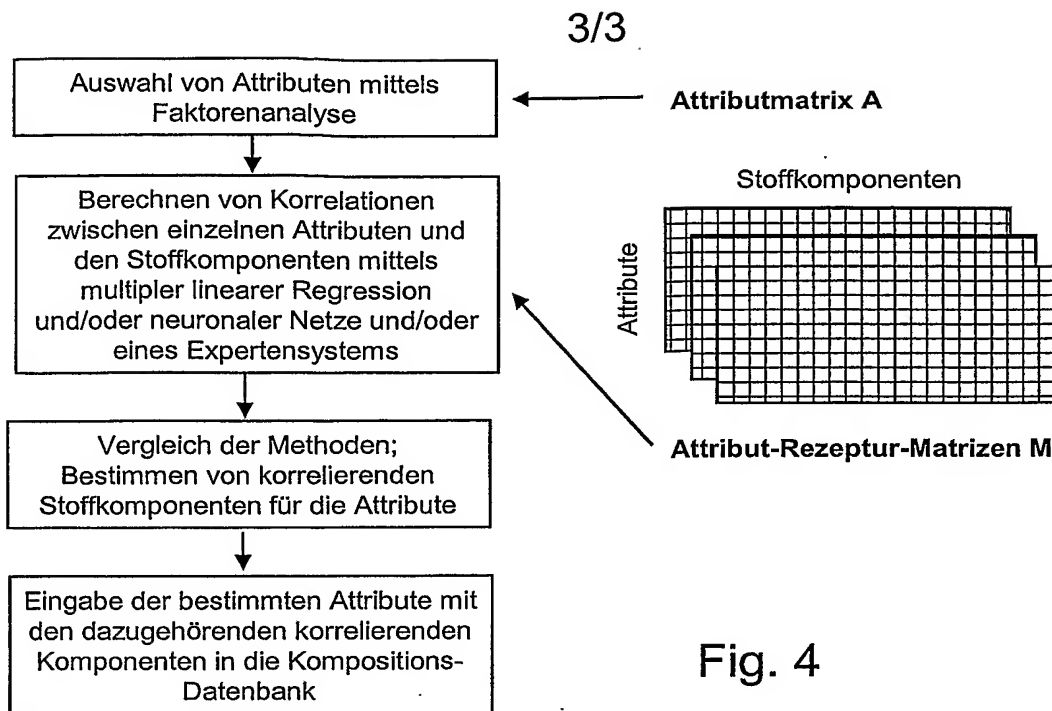


Fig. 3



INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International Application No
PCT/CH2005/000081

A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER

IPC 7 G01N33/00 G06F17/30

According to International Patent Classification (IPC) or to both national classification and IPC

B. FIELDS SEARCHED

Minimum documentation searched (classification system followed by classification symbols)

IPC 7 G01N G06F

Documentation searched other than minimum documentation to the extent that such documents are included in the fields searched

Electronic data base consulted during the international search (name of data base and, where practical, search terms used)

EPO-Internal, BIOSIS, FSTA, PAJ

C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category *	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
X	PATENT ABSTRACTS OF JAPAN vol. 2003, no. 05, 12 May 2003 (2003-05-12) & JP 2003 006485 A (NISSHIN SEIFUN GROUP INC), 10 January 2003 (2003-01-10) abstract	1,9
Y	STAMPANONI KOEFERLI C ET AL: "Application of classical and novel sensory techniques in product optimization" LEBENSMITTEL-WISSENSCHAFT U. -TECHNOLOGIE, vol. 31, no. 5, 1998, pages 407-417, XP002322102 ISSN: 0023-6438 page 413, left-hand column, last paragraph - right-hand column, paragraph 1 ----- -/-	1-9

☒ Further documents are listed in the continuation of box C.

☒ Patent family members are listed in annex.

* Special categories of cited documents:

- *A* document defining the general state of the art which is not considered to be of particular relevance
- *E* earlier document but published on or after the international filing date
- *L* document which may throw doubts on priority claim(s) or which is cited to establish the publication date of another citation or other special reason (as specified)
- *O* document referring to an oral disclosure, use, exhibition or other means
- *P* document published prior to the international filing date but later than the priority date claimed

- *T* later document published after the international filing date or priority date and not in conflict with the application but cited to understand the principle or theory underlying the invention
- *X* document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered novel or cannot be considered to involve an inventive step when the document is taken alone
- *Y* document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered to involve an inventive step when the document is combined with one or more other such documents, such combination being obvious to a person skilled in the art.
- *&* document member of the same patent family

Date of the actual completion of the international search

30 March 2005

Date of mailing of the international search report

08/04/2005

Name and mailing address of the ISA

European Patent Office, P.B. 5818 Patentlaan 2
NL - 2280 HV Rijswijk
Tel. (+31-70) 340-2040, Tx. 31 651 epo nl,
Fax: (+31-70) 340-3016

Authorized officer

Wilhelm, J

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International Application No
PCT/CH2005/000081

C.(Continuation) DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category °	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
Y	MOSKOWITZ H R: "Explorations of the functional relations between image and sensory attributes of soup." FOOD QUALITY AND PREFERENCE, vol. 13, no. 3, 2002, pages 139-151, XP002322103 table 5	1-9
A	STAMPANONI C R: "Quantitative flavor profiling. An effective tool in flavor perception." FOOD MARKETING & TECHNOLOGY 1993 SENSORY DEP., GIVAUDAN-ROURE FLAVORS LTD., DUBENDORF, SWITZERLAND, vol. 7, no. 1, February 1993 (1993-02), page 4, XP008033289 cited in the application the whole document	1-9
A	EP 1 351 053 A (QUEST INTERNAT FRAGRANCE COMPA) 8 October 2003 (2003-10-08) the whole document	1-9

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International Application No
PCT/CH2005/000081

Patent document cited in search report		Publication date	Patent family member(s)		Publication date
JP 2003006485	A	10-01-2003	NONE		
EP 1351053	A	08-10-2003	EP	1351053 A1	08-10-2003

INTERNATIONALER RECHERCHENBERICHT

Internationales Aktenzeichen
PCT/CH2005/000081

A. KLASSIFIZIERUNG DES ANMELDUNGSGEGENSTANDES
IPK 7 G01N33/00 G06F17/30

Nach der Internationalen Patentklassifikation (IPK) oder nach der nationalen Klassifikation und der IPK

B. RECHERCHIERTE GEBIETE

Recherchierter Mindestprüfstoff (Klassifikationssystem und Klassifikationssymbole)
IPK 7 G01N G06F

Recherchierte aber nicht zum Mindestprüfstoff gehörende Veröffentlichungen, soweit diese unter die recherchierten Gebiete fallen

Während der internationalen Recherche konsultierte elektronische Datenbank (Name der Datenbank und evtl. verwendete Suchbegriffe)

EPO-Internal, BIOSIS, FSTA, PAJ

C. ALS WESENTLICH ANGESEHENE UNTERLAGEN

Kategorie*	Bezeichnung der Veröffentlichung, soweit erforderlich unter Angabe der in Betracht kommenden Teile	Betr. Anspruch Nr.
X	PATENT ABSTRACTS OF JAPAN Bd. 2003, Nr. 05, 12. Mai 2003 (2003-05-12) & JP 2003 006485 A (NISSHIN SEIFUN GROUP INC), 10. Januar 2003 (2003-01-10) Zusammenfassung	1,9
Y	STAMPANONI KOEFERLI C ET AL: "Application of classical and novel sensory techniques in product optimization" LEBENSMITTEL-WISSENSCHAFT U. -TECHNOLOGIE, Bd. 31, Nr. 5, 1998, Seiten 407-417, XP002322102 ISSN: 0023-6438 Seite 413, linke Spalte, letzter Absatz - rechte Spalte, Absatz 1 ----- -/--	1-9

☒ Weitere Veröffentlichungen sind der Fortsetzung von Feld C zu entnehmen

☒ Siehe Anhang Patentfamilie

* Besondere Kategorien von angegebenen Veröffentlichungen :

- *A* Veröffentlichung, die den allgemeinen Stand der Technik definiert, aber nicht als besonders bedeutsam anzusehen ist
- *E* älteres Dokument, das jedoch erst am oder nach dem internationalen Anmeldedatum veröffentlicht worden ist
- *L* Veröffentlichung, die geeignet ist, einen Prioritätsanspruch zweifelhaft erscheinen zu lassen, oder durch die das Veröffentlichungsdatum einer anderen im Recherchenbericht genannten Veröffentlichung belegt werden soll oder die aus einem anderen besonderen Grund angegeben ist (wie ausgeführt)
- *O* Veröffentlichung, die sich auf eine mündliche Offenbarung, eine Benutzung, eine Ausstellung oder andere Maßnahmen bezieht
- *P* Veröffentlichung, die vor dem internationalen Anmeldedatum, aber nach dem beanspruchten Prioritätsdatum veröffentlicht worden ist

T Spätere Veröffentlichung, die nach dem internationalen Anmeldedatum oder dem Prioritätsdatum veröffentlicht worden ist und mit der Anmeldung nicht kollidiert, sondern nur zum Verständnis des der Erfindung zugrundeliegenden Prinzips oder der ihr zugrundeliegenden Theorie angegeben ist

X Veröffentlichung von besonderer Bedeutung; die beanspruchte Erfindung kann allein aufgrund dieser Veröffentlichung nicht als neu oder auf erfinderischer Tätigkeit beruhend betrachtet werden

Y Veröffentlichung von besonderer Bedeutung; die beanspruchte Erfindung kann nicht als auf erfinderischer Tätigkeit beruhend betrachtet werden, wenn die Veröffentlichung mit einer oder mehreren anderen Veröffentlichungen dieser Kategorie in Verbindung gebracht wird und diese Verbindung für einen Fachmann naheliegend ist

Z Veröffentlichung, die Mitglied derselben Patentfamilie ist

Datum des Abschlusses der internationalen Recherche

30. März 2005

Absendedatum des internationalen Recherchenberichts

08/04/2005

Name und Postanschrift der Internationalen Recherchenbehörde
Europäisches Patentamt, P.B. 5818 Patentlaan 2
NL - 2280 HV Rijswijk
Tel. (+31-70) 340-2040, Tx. 31 651 epo nl,
Fax: (+31-70) 340-3016

Bevollmächtigter Bediensteter

Wilhelm, J

C.(Fortsetzung) ALS WESENTLICH ANGESEHENE UNTERLAGEN

Kategorie°	Bezeichnung der Veröffentlichung, soweit erforderlich unter Angabe der in Betracht kommenden Teile	Betr. Anspruch Nr.
Y	MOSKOWITZ H R: "Explorations of the functional relations between image and sensory attributes of soup." FOOD QUALITY AND PREFERENCE, Bd. 13, Nr. 3, 2002, Seiten 139-151, XP002322103 Tabelle 5	1-9
A	STAMPANONI C R: "Quantitative flavor profiling. An effective tool in flavor perception." FOOD MARKETING & TECHNOLOGY 1993 SENSORY DEP., GIVAUDAN-ROURE FLAVORS LTD., DUBENDORF, SWITZERLAND, Bd. 7, Nr. 1, Februar 1993 (1993-02), Seite 4, XP008033289 in der Anmeldung erwähnt das ganze Dokument	1-9
A	EP 1 351 053 A (QUEST INTERNAT FRAGRANCE COMPA) 8. Oktober 2003 (2003-10-08) das ganze Dokument	1-9

Internationales Aktenzeichen

Im Recherchenbericht
angeführtes Patentdokument

Datum der
Veröffentlichung

Mitglied(er) der
Patentfamilie

Datum der
Veröffentlichung

EP 1351053	A	08-10-2003	EP	1351053 A1	08-10-2003
------------	---	------------	----	------------	------------